

Теория динамических систем

ВВЕДЕНИЕ

Основные разделы

Законы термодинамики в биологических системах. Примеры динамических систем в химии и биологии. История становления теории динамических систем.

Основы химической кинетики. Автокатализ, последовательные и параллельные реакции. Ферментативная кинетика. Линейный анализ стабильности – общее представление

Общие решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) в биологии. Бифуркационный анализ. Нормальные формы бифуркаций. Подкритические и надкритические бифуркации.

Линейный анализ стабильности стационарного состояния или предельного цикла.

Бистабильные системы и переключатели

Периодические решения. Предельный цикл. Реакция Белоусова-Жаботинского. Временная задержка. Классические колебательные реакции

Дискретные последовательности. Сечение Пуанкаре. Динамический хаос, фракталы.

Связанные осцилляторы. Сети активных элементов.

Распространение волн в активных средах. Классификация волн. Понятия о системах реакция-диффузия. Экологические модели как пример динамических систем.

Законы термодинамики в биологических системах

Термодинамика является разделом физики, в котором изучают энергию, её передачу из одного места в другое и преобразование из одной формы в другую.

Одним из основных специфических свойств живых существ является их способность превращать и хранить энергию в различных формах. Основные принципы термодинамики универсальны для живой и неживой природы.

Термодинамика использует понятие системы. Любая совокупность изучаемых объектов может быть названа **термодинамической системой** (клетка, орган, организм, биосфера и т.п.)

Существует три вида термодинамических систем в зависимости от их взаимодействия с окружающей средой:

Изолированные системы не обмениваются с внешней средой ни энергией, ни веществом. Таких систем в реальных условиях не существует, но понятие изолированной системы используют для понимания главных термодинамических принципов.

Закрытые системы обмениваются со средой энергией, но не веществом. Примером такой системы может служить закрытый термос с налитым в него чаем.

Открытые системы обмениваются с внешней средой как энергией, так и веществом. Все живые существа относятся к открытым термодинамическим системам.

Внутренняя энергия, работа и тепло.

Энергия в широком значении - способность системы выполнять некоторую работу.

Внутренняя энергия системы - сумма кинетической и потенциальной энергии всех молекул, составляющих систему.

Общая энергия системы складывается из её внутренней энергии и кинетической и потенциальной энергии системы, взятой в целом. Величина внутренней энергии зависит от параметров состояния термодинамической системы. Абсолютная величина внутренней энергии не может быть определена, но физический смысл имеет *изменение* внутренней энергии, которое может быть измерено.

Есть две формы передачи энергии: *работа и теплота*. Эти величины не являются параметрами состояния системы, так как зависят от пути процесса, в ходе которого изменяется энергия системы.

Теплота является энергией, переданной от одной системы другой из-за разницы их температур (*теплопроводность, конвекция и излучение*).

Теплопроводность - процесс теплопередачи между объектами при их непосредственном контакте.

Конвекция - это процесс теплопередачи с одного объекта на другой движением жидкости или газа.

Излучение – передача теплоты передаваться и через вакуум космического пространства электромагнитными волнами разной длины волны).

В биологических системах совершаются различные формы работы: механическая работа, выполняемая против механических сил; осмотическая работа, состоящая в транспорте различных веществ благодаря разности их концентраций; электрическая работа, заключающаяся в ионном транспорте в электрическом поле и т.п.

Первый закон термодинамики (закон сохранения энергии). Он указывает, что общая энергия в изолированной системе - величина постоянная и не изменяется во времени, а лишь переходит из одной формы другую. Когда в системе происходит некоторый процесс, сумма всей энергии, переданной через границу системы (теплотой или работой), равна общему изменению энергии этой системы.

Первый закон термодинамики связывает изменение внутренней энергии системы dU , теплоту ΔQ , переданную системе, и работу ΔA , совершённую системой:

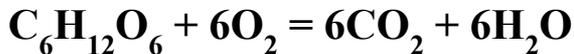
$$\Delta Q = \Delta U + \Delta A \quad (1)$$

При передаче теплоты в систему ΔQ положительно (при передаче теплоты системой ΔQ отрицательно). Работа, совершённая системой считается положительной, работа, совершённая над системой - отрицательной.

Первый закон термодинамики живых организмов

Энергия пищевых продуктов используется в клетках первоначально для синтеза макроэргических соединений (АТФ). АТФ, в свою очередь, может использоваться как источник энергии почти для всех процессов в клетке.

Пищевые вещества окисляются вплоть до конечных продуктов, которые выделяются из организма. Например, углеводы окисляются в организме до углекислого газа и воды. Такие же конечные продукты образуются при сжигании углеводов в калориметре:



Принципе Гесса: тепловой эффект многоступенчатого химического процесса не зависит от его промежуточных этапов, а определяется лишь начальным и конечным состояниями системы. В конечном итоге вся энергия, поступившая в организм, превращается в теплоту. Также при образовании АТФ лишь часть энергии запасается, большая - рассеивается в форме тепла. При использовании энергии АТФ функциональными системами организма большая часть этой энергии также переходит в тепловую. Оставшаяся часть энергии в клетках идёт на выполнении ими функции, однако, в конечном счёте, превращается в теплоту.

Второй закон термодинамики

Второй закон термодинамики указывает, что все реальные процессы (в том числе в биологических системах), сопровождаются рассеянием некоторой части энергии в теплоту. Все формы энергии (механическая, химическая, электрическая и т.п.) могут быть превращены в теплоту без остатка. Но сама теплота не может превращаться полностью в другие формы энергии. Не существует двигателя или процесса, который бы преобразовывал теплоту в другую форму энергии с 100% эффективностью. Как известно, рассеяние теплоты означает энергетическое разложение. Теплота - деградированная форма энергии, поскольку термическое движение молекул беспорядочный и вероятностный процесс. Таким образом, энергетическое рассеивание в форме теплоты необратимо.

Согласно второму закону термодинамики, каждый реальный процесс, происходящий в термодинамической системе, может осуществляться только в одном направлении. Противоположный процесс, при котором как система, так и окружающая среда возвращались бы в их первоначальные состояния, невозможен.

Одна из формулировок второго закона термодинамики (Клазиуса) указывает, *что теплота не может передаваться самопроизвольно от тела, обладающего более низкой температурой, телу с более высокой температурой.*

Любой реальный процесс является в той или иной мере необратимым.

Энтропия

Направление спонтанных процессов в изолированных системах характеризуется параметром состояния, который называется *энтропией* (из греч. "преобразование"). Изменение энтропии системы dS определяется отношением теплоты dQ , введённой в систему или выведенного из системы, к абсолютной температуре T системы, при которой этот процесс происходит:

$$dS = dQ/T(2)$$

Энтропия изолированной системы возрастает, если система стремится в состояние равновесия, и достигает своей максимальной величины в этом состоянии. Энтропия возрастает во всех реальных термодинамических процессах.

Энтропия системы имеет тесное отношение к показателю упорядоченности или беспорядка составляющих системы. Согласно принципу Больцмана, энтропия системы S в данном состоянии пропорциональна термодинамической вероятности W этого состояния:

$$S = k \ln W (3), \text{ где } k - \text{ константа Больцмана.}$$

Термодинамическая вероятность является числом микросостояний системы, посредством которых реализуется данное макросостояние системы. Чем больше возможно микросостояний (вариантов расположения частиц), тем более неупорядочена система, тем больше - величины W и S .

Каждая система стремится к переходу из менее вероятного высокоупорядоченного состояния в статистически более вероятные состояния, характеризующиеся беспорядочным расположением молекул. Можно сказать, что каждая система характеризуется тенденцией самопроизвольного перехода к состоянию максимального молекулярного беспорядка или хаоса.

Термодинамика неравновесных процессов

Процессы, проходящие в биологических системах, являются необратимыми. *Термодинамика неравновесных процессов* основана на таких принципах и понятиях как линейные соотношения, производство энтропии, стационарное состояние, теорема Пригожина.

Линейные соотношения

Закон линейных соотношений указывает, что изменение физической величины J является линейной функцией соответствующей термодинамической силы X , где L является коэффициентом прямой пропорциональности:

$$\mathbf{J} = \mathbf{LX}$$

Линейный закон обобщает многие эмпирические принципы, например, закон Фика (зависимость переноса веществ от концентрационного градиента), закон Ома (зависимость переноса электрического заряда от градиента электрического потенциала) и т.п.

Каждое отдельное изменение в системе может вызвать только уменьшение её свободной энергии и повышение энтропии. Но другие изменения в этой же системе могут происходить так, что повышение энтропии при одном изменении компенсировалось её уменьшением из-за другого изменения.

Производство энтропии в открытой системе

Изменение энтропии в открытой системе dS состоит из двух компонентов: dS_i - производство энтропии в системе в результате необратимости процессов и dS_e - отражает взаимодействие между системой и окружающей средой.

$$ds = dS_i + dS_e \quad (9)$$

Термодинамика необратимых процессов рассматривается также показатель производства энтропии в открытых системах:

$$ds/dt = dS_i/dt + dS_e/dt$$

Как видно, два компонента играют роль в процессе производства энтропии в открытой системе: показатель производства энтропии в системе и показатель изменения энтропии из-за энергообмена с окружающей средой. Согласно второму закону термодинамики, первый компонент всегда положительный, а второй может быть как положительным, так и отрицательным.

Стационарное состояние открытой системы

Состояние системы называется стационарным, если величина энтропии не изменяется во времени, то есть $dS = 0$. Это возможно, когда производство энтропии в системе полностью компенсируется энтропией, выходящей из системы ($dS_i = -dS_e$).

Но стационарное состояние существенно отличается от состояния равновесия, поскольку обменивается энергией с окружающей средой: количество свободной энергии в системе необходимо поддерживать. Энтропия системы в стационарном состоянии - стабильная, но не максимальная. Градиенты и потоки сохраняются в системе.

Основная характеристика стационарного состояния определена теоремой Пригожина, согласно которой производство энтропии в стационарном состоянии минимально ($dS = \min$). Это означает, что система рассеивает минимальную энергию в среду и нуждается в минимальном поступлении свободной энергии для поддержания своего состояния.

Теорема Пригожина объясняет устойчивость стационарных состояний в открытых системах. Если система выходит из этого состояния самопроизвольно, происходит увеличение энтропии. В результате в системе возникают процессы, которые стремятся вернуть её в стационарное состояние.

Многие физиологические параметры являются достаточно стабильными. Их стационарный уровень регулируют специальные физиологические механизмы. В качестве примера поддержания стационарного состояния можно привести терморегуляцию организма. Постоянство температуры обеспечивается поддержанием баланса теплопродукции и теплоотдачи. В результате температура тела поддерживается неизменной, несмотря на колебания внешней температуры.

Динамическая система — множество элементов, для которого задана функциональная зависимость между временем и положением в фазовом пространстве каждого элемента системы, что позволяет изучать и описывать эволюцию систем во времени.

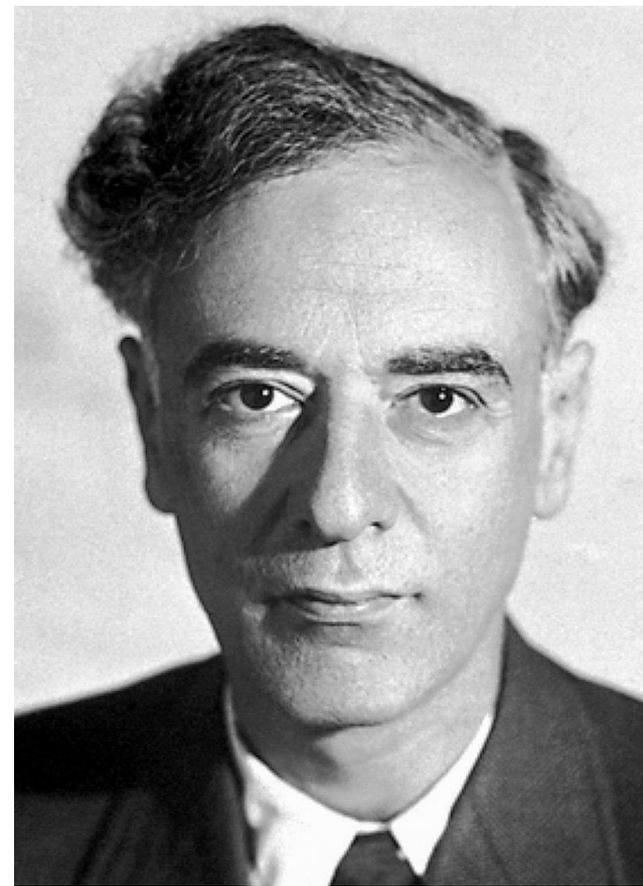
Признаки:

1. Динамическая система представляет собой такую математическую модель некоего объекта, процесса или явления, в которой пренебрегают «флуктуациями и всеми другими статистическими явлениями».
2. Динамическая система также может быть представлена как система, обладающая «состоянием». При таком подходе, динамическая система в целом описывает динамику некоторого процесса, а именно: процесс перехода системы из одного состояния в другое.
3. Фазовое пространство системы — совокупность всех допустимых состояний динамической системы. Таким образом, динамическая система характеризуется своим начальным состоянием и законом, по которому система переходит из начального состояния в другое.

Различают системы с **дискретным** временем и системы с **непрерывным** временем:

- с **дискретным временем (каскады)**: поведение системы описывается последовательностью состояний;
- с **непрерывным временем (потoki)** - состояние системы определено для каждого момента времени оси. Каскады и потоки являются основным предметом рассмотрения в символической и топологической динамики.

Лев Давидович Ландау (1908 - 1968)



Квантовая механика, физика твёрдого тела, магнетизм, физика низких температур, сверхпроводимость и сверхтекучесть, физика космических лучей, астрофизика, гидродинамика, квантовая электродинамика, квантовая теория поля, физика атомного ядра и физика элементарных частиц, теория химических реакций, физика плазмы — вот далеко не полный перечень областей, фундаментальный вклад в которые внёс Л. Д. Ландау.

Нобелевская премия по физике 1962 г. за пионерские исследования в теории конденсированного состояния, в особенности жидкого гелия

Андрей Николаевич Колмогоров (1903 - 1987)



Один из основоположников современной теории вероятностей, им получены фундаментальные результаты в топологии, геометрии, математической логике, классической механике, теории турбулентности, теории сложности алгоритмов, теории информации, теории функций, теории тригонометрических рядов, теории меры, теории приближения функций, теории множеств, теории дифференциальных уравнений, теории динамических систем, функциональном анализе и в ряде других областей математики и её приложений.

Илья Романович Пригожин (1917 – 2003г.г.)



Основная часть его работ посвящена неравновесной термодинамике и статистической механике необратимых процессов. Одно из главных достижений заключалось в том, что было показано существование неравновесных термодинамических систем, которые, при определённых условиях, поглощая вещество и энергию из окружающего пространства, могут совершать качественный скачок к усложнению (**диссипативные структуры**). Причём такой скачок не может быть предсказан, исходя из классических законов статистики. Такие системы позже были названы системами Пригожина, а их расчет стал возможен благодаря его работам.

Нобелевская премия 1977 - доказал одну из основных теорем линейной термодинамики неравновесных процессов — о минимуме производства энтропии в открытой системе (теорема Пригожина).

Для нелинейной области в соавторстве с Гленсдорфом сформулировал общий критерий эволюции Гленсдорфа-Пригожина. Ввёл термин «переоткрытие времени», определяющий проблему объяснения существования явления времени.

В 1982 году Пригожин становится иностранным членом Академии наук СССР.

Дмитрий Викторович Аносов (1936 - 2014)



советский и российский математик, академик, специалист по теории динамических систем и дифференциальных уравнений, дифференциальной геометрии и топологии.